

прост. группа C_{3v}), раскладывались в степенной ряд и минимизировались нелинейным методом наименьших квадратов. Впервые получены модули упругости (6 компонент в орто-ромбической системе симметрии) и модули всестороннего сжатия (Реусса (B_R), Войта (B_V) и их средние (B)). Теоретические величины B находятся в хорошем соответствии с имеющимися экспериментальными данными. Обсуждается эволюция электронных и упругих свойств монокристаллов в зависимости от природы боридообразующего металла в ряду $VB_2 \rightarrow CrB_2 \rightarrow NiB_2$.

Работа поддержана РФФИ, проект № 04-03-32082.

НЕСТЕХИОМЕТРИЯ И ДЕФЕКТНАЯ СТРУКТУРА $LaCr_{0.3}Co_{0.7}O_{3-\delta}$

Карпов Е. Н., Цветков Д. С., Выхов А. И.

Уральский государственный университет, Екатеринбург

Перовскитоподобный кобальтит лантана $LaCoO_3$ обладает смешанной проводимостью с преобладанием электронной составляющей. Поэтому соединения на его основе могут использоваться как материалы для изготовления катодов твердооксидных топливных элементов, CO_2 лазеров, кислородных мембран, катализаторов.

Свойства реальных твердых тел определяются их реальной (дефектной) структурой. Исследуя дефектную структуру, проводят измерение и моделирование какого-либо свойства. По степени корреляции экспериментальной и теоретической зависимостей судят о применимости выбранной модели для данной системы.

В качестве исследуемого соединения был выбран кобальтит лантана, допированный хромом, состава $LaCr_{0.3}Co_{0.7}O_{3-\delta}$. Была предложена модель дефектообразования, учитывающая большее сродство к электрону кобальта по сравнению с хромом.

Было проведено моделирование дефектной структуры и измерение нестехиометрии методом кулонометрического титрования в интервале $-4 \leq \lg(P_{O_2}) \leq -0.68$. При этом наблюдали увеличение нестехиометрии при повышении температуры и/или уменьшении давления кислорода. На основании полученных данных были рассчитаны мольные энтальпия и энтропия образования кислородных вакансий. При решении системы уравнений предложенной модели была получена аналитическая зависимость нестехиометрии от давления кислорода. При сглаживании данной кривой к экспериментальным точкам были получены значения констант квазихимических реакций, использованных в модели.

Работа выполнена при поддержке грантов Мин. Обр. РФ № А04-2.11-848, РФФИ № 04-03-32118, РФФИ № 04-03-32142.